

Das Stern-Gerlach Experiment

Eine Gegendarstellung

L. Fritsche

Seniorenseminar 14. November 2008

The unmeasurability of the spin of a free electron (resp. charged fermion)

(From: J. A. Wheeler and W. H. Zurek (Eds.) *Quantum Theory of measurement*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey (1983), p.699

“....the Stern-Gerlach effect which clearly exhibited a contribution to the magnetic moment of an atom from an electron bound in a 2S state; but **what Bohr demonstrated** was precisely that **with a free electron a Stern-Gerlach experiment could not succeed**, because the effect of the Lorentz force would inevitably blur any Stern-Gerlach pattern.”

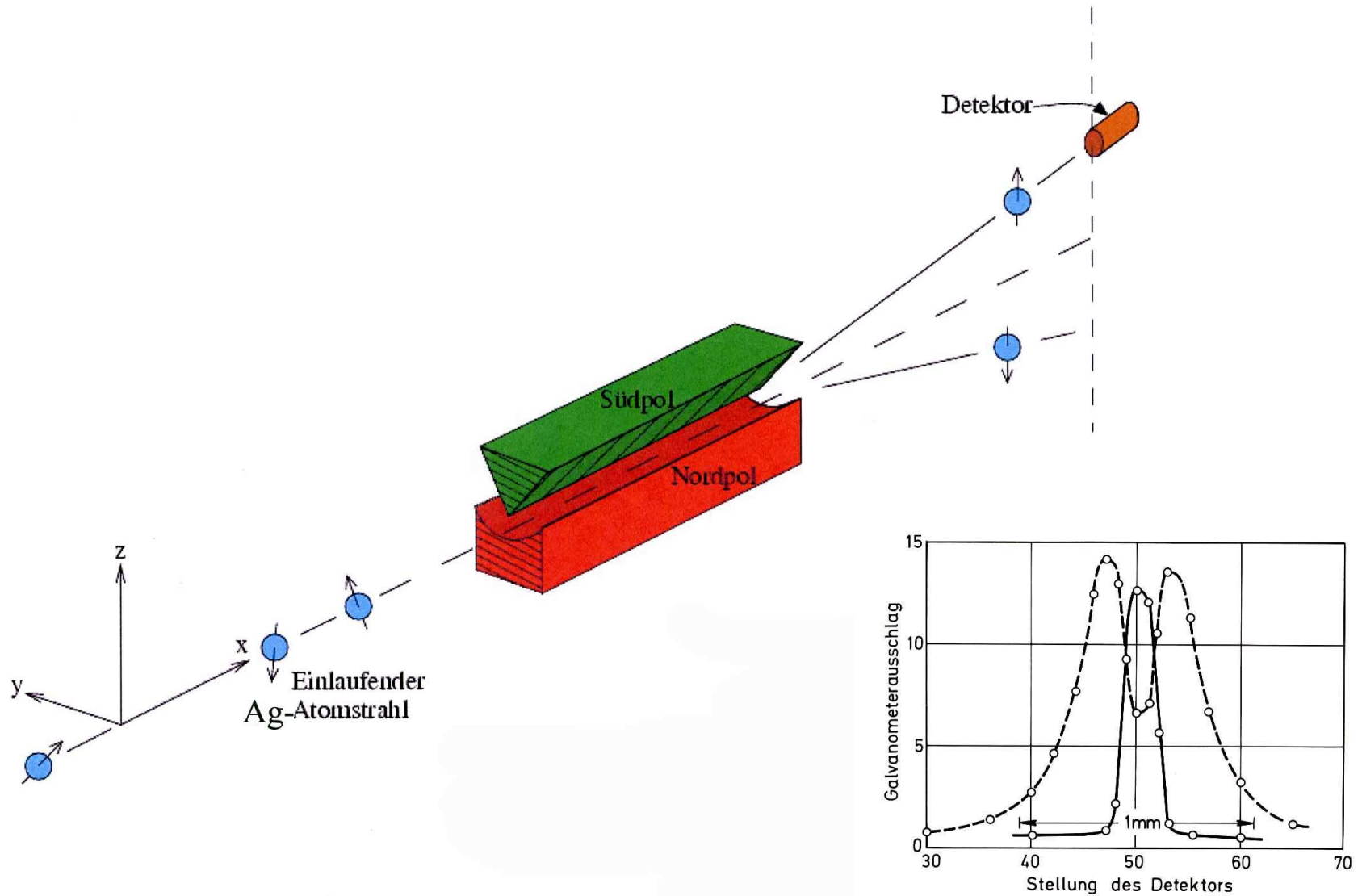
Nichtsdestoweniger taucht in den Lehrbüchern zum Stichwort “Messung des Spins eines freien Teilchens” ausnahmslos das Stern-Gerlach-Experiment auf.

Die folgenden Überlegungen beziehen sich **nur** auf ein Elektron, das in einem Atom gebunden ist.

Aufschlussreiches Zitat von **John Bell** zum Stern-Gerlach Experiment (Journal de Physique, Colloque C2, supplément au n°3, Tome 42, mare **1981**, p.C 2-45)

“Phenomena of this kind [i.e. sorting spin carrying atoms into two beams] made physicists despair of finding any consistent space-time picture of what goes on the atomic and subatomic scale.....many came to hold not only that it is difficult to find a coherent picture but that it is wrong to look for one...”

Der Stern-Gerlach-Versuch (1921-22)



Weitere Versuche mit anderen Atomen:

A. Leu, Z. Physik **41**, 551 (1927): Versuche mit Na-, K-, Zn-, Cd-, **Tl**-Atomen

E. Wrede, Z. Physik **41**, 569 (1927): Versuche mit H-Atomen

Erstaunliches Ergebnis der Experimente von A. Leu, Z. Physik **41**, 551 (**1927**) mit **Tl**-Atomen:

Konfiguration: 1s bis 5p gefüllt, 5d **10** (gefüllt), 6s **2** (gefüllt), 6p **1**

Das Tl-Atom besitzt also einen komplett spin-gesättigten Rumpf mit 80 Elektronen und ein einzelnes **p(!)**-Elektron. Im Gegensatz dazu besaßen alle anderen Atome, mit denen Stern-Gerlach-Experimente ausgeführt worden sind, ein einzelnes äußeres **s** -Elektron, das keine Spin-Bahn-Kopplung spürt. Bei dem 6p-Elektron des Tl-Atoms führt die **Spin-Bahnkopplung** auf einen Landé-Faktor $g = \frac{2}{3}$, und die magnetische Quantenzahl ist im Grundzustand $M_j = \frac{1}{2}$. Also hat das 6p-Elektron im Grundzustand ein effektives magnetisches Moment:

$$\mu_{eff} = \mu_B g M_j = \mu_B \frac{1}{3}.$$

Genau dieses um ein Drittel kleinere magnetische Moment ergab sich bei der Auswertung der Strahlaufspaltungen für Tl-Atome!

Eine Erklärung der **Spin-Bahnkopplung** war aber erst nach Erscheinen der Diracschen Theorie möglich (P. A. M. Dirac, Proc. Royal Soc. (A) **117**, 610 (**1928**), ebd. **118**, 351 (**1928**))

Der Betrag der Kraft, die auf das Spinnmoment (und damit auf das ganze Atom) wirkt, ist gegeben durch

$$F_z = \mu_{\parallel} \frac{\partial B_z}{\partial z} .$$

Hier bezeichnet $\partial B_z / \partial z$ den Feldgradienten, den wir mit f_{gz} abkürzen wollen, und μ_{\parallel} ist die feldparallele Komponente des magnetischen Moments, also die Komponente parallel zur z -Richtung:

$$\mu_{\parallel} = \mu_B \cos \theta .$$

Die Atome durchfliegen die Apparatur der Länge L in guter Näherung mit gleicher Geschwindigkeit v_{at} und daher mit gleicher Durchflugszeit $\Delta t = L/v_{at}$. Daraus ergibt sich eine Ablenkung am Ausgang des Magneten in z -Richtung

$$\Delta z = \mu_B \frac{f_g}{2 m_{at}} \left(\frac{L}{v_{at}} \right)^2 \cos \theta .$$

Da die Atome in den Magneten statistisch unter jedem Winkel θ ihrer Spinnmomente bzgl. der z -Richtung einfliegen, müsste der Detektor nach voranstehender Überlegung kontinuierlich Atome registrieren, wenn man ihn aus der gezeichneten Position langsam über die x -Achse nach unten schwenkte. In Wirklichkeit findet man aber deutliche Maxima der Anzeigerate bei

$$\Delta z = \pm \mu_B \frac{f_g}{2 m_{at}} \left(\frac{L}{v_{at}} \right)^2 .$$

Wie ist das zu erklären?

Theorie des Stern-Gerlach-Experiments

Im folgenden soll gezeigt werden, dass eine z -Orientierung des Drehimpulses der einfliegenden Atome nur durch die x -Komponente des zuvor passiertenen **magnetischen Streufeldes** bewirkt werden kann. Vor Eintritt in dieses Streufeld sind die Atome dem Erdmagnetfeld

$$B_{Erde} \approx 5 \cdot 10^{-5} T$$

ausgesetzt. Ihr Drehimpuls präzessiert in diesem Feld mit der (**L**armor)-Frequenz

$$\nu_L^{Erde} = 1.25 \cdot 10^6 s^{-1} \quad \hookrightarrow \quad T_L^{Erde} = \frac{1}{\nu_L^{Erde}} = 0.8 \cdot 10^{-6} s \quad (\text{Präzessionszeit}).$$

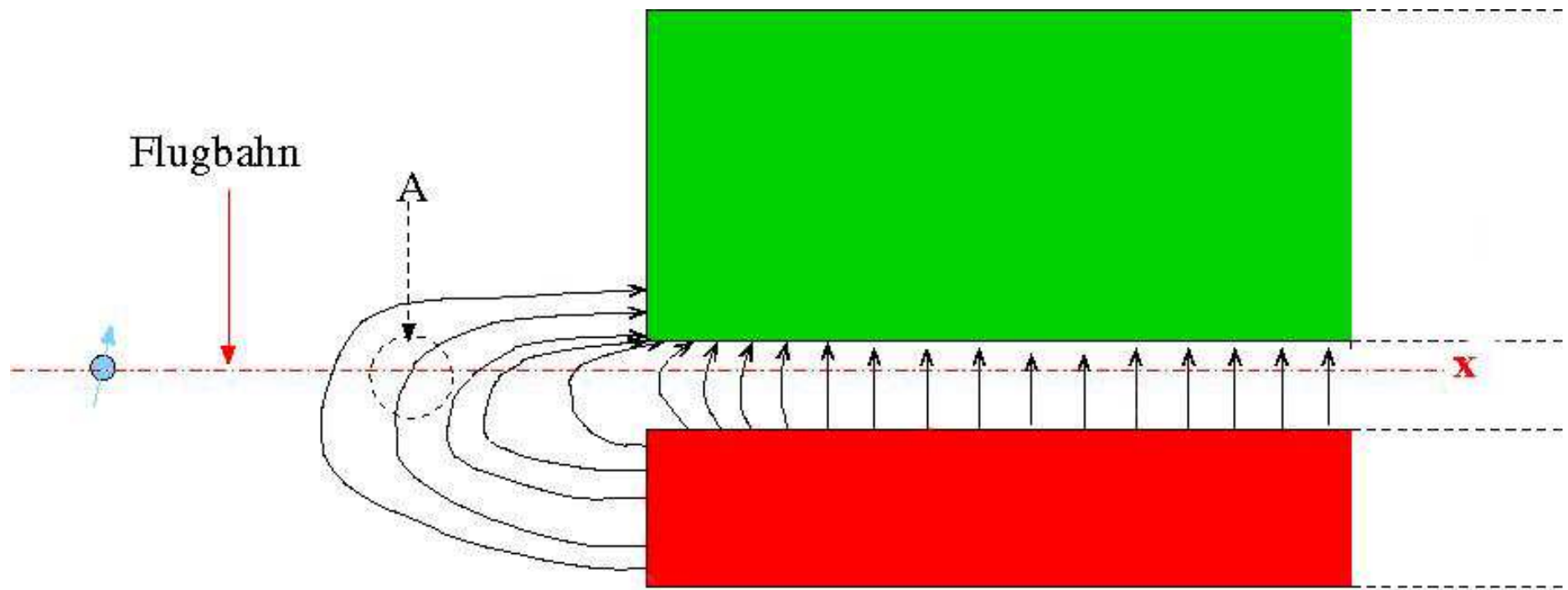
Die Atome bewegen sich mit einer Geschwindigkeit

$$v_{at} \approx 10^5 cm s^{-1}.$$

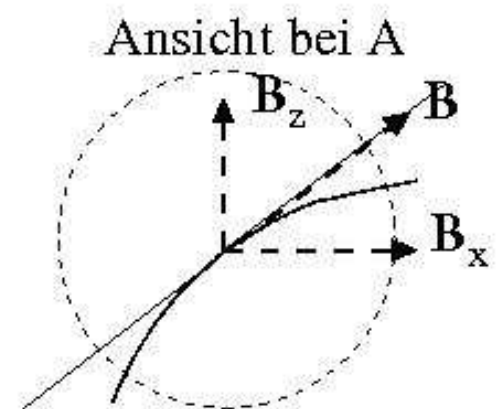
Sie legen daher bei einer Präzession im Erdmagnetfeld eine Wegstrecke von

$$l_{T_L^{Erde}} \approx 0.8 mm$$

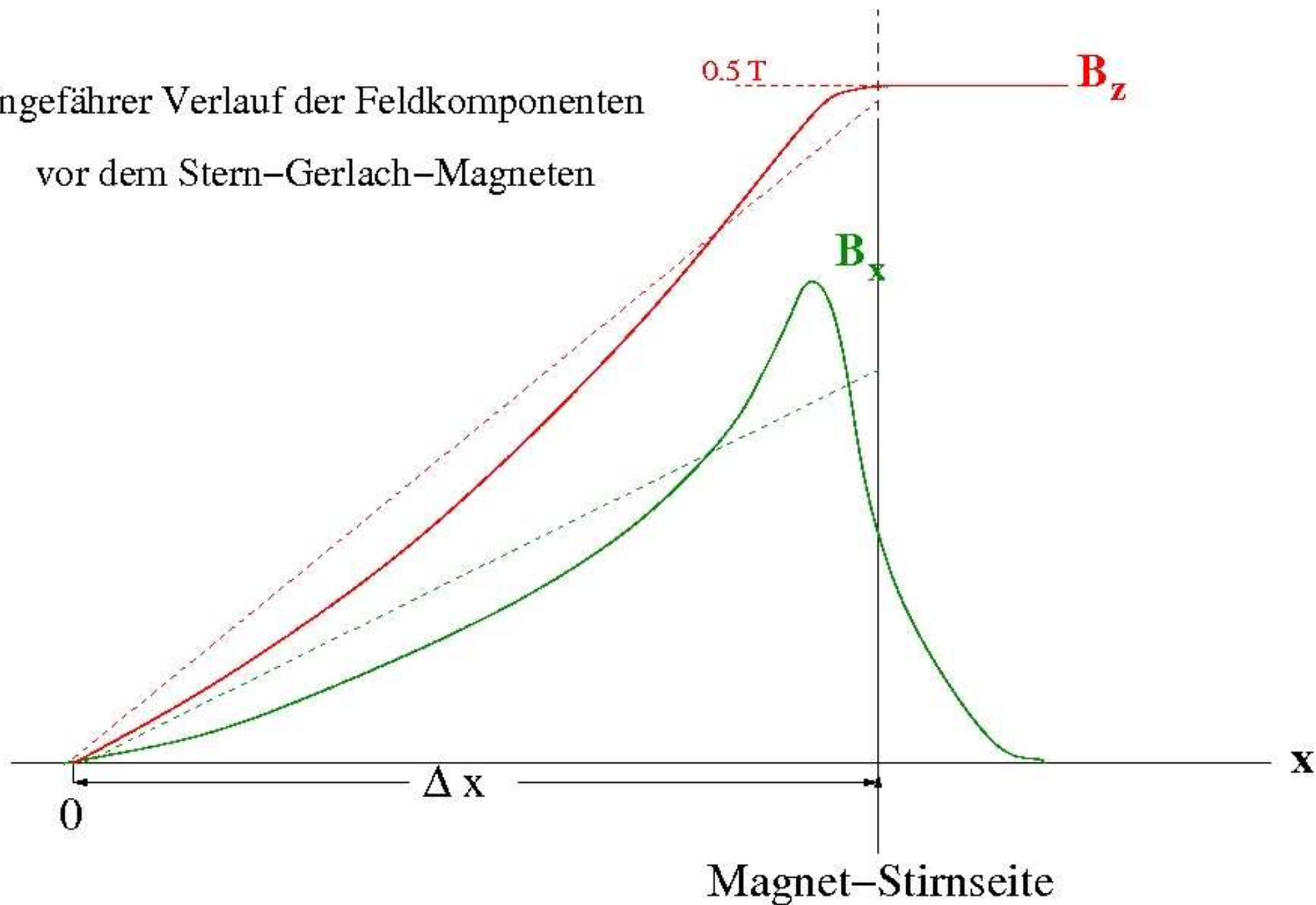
zurück.

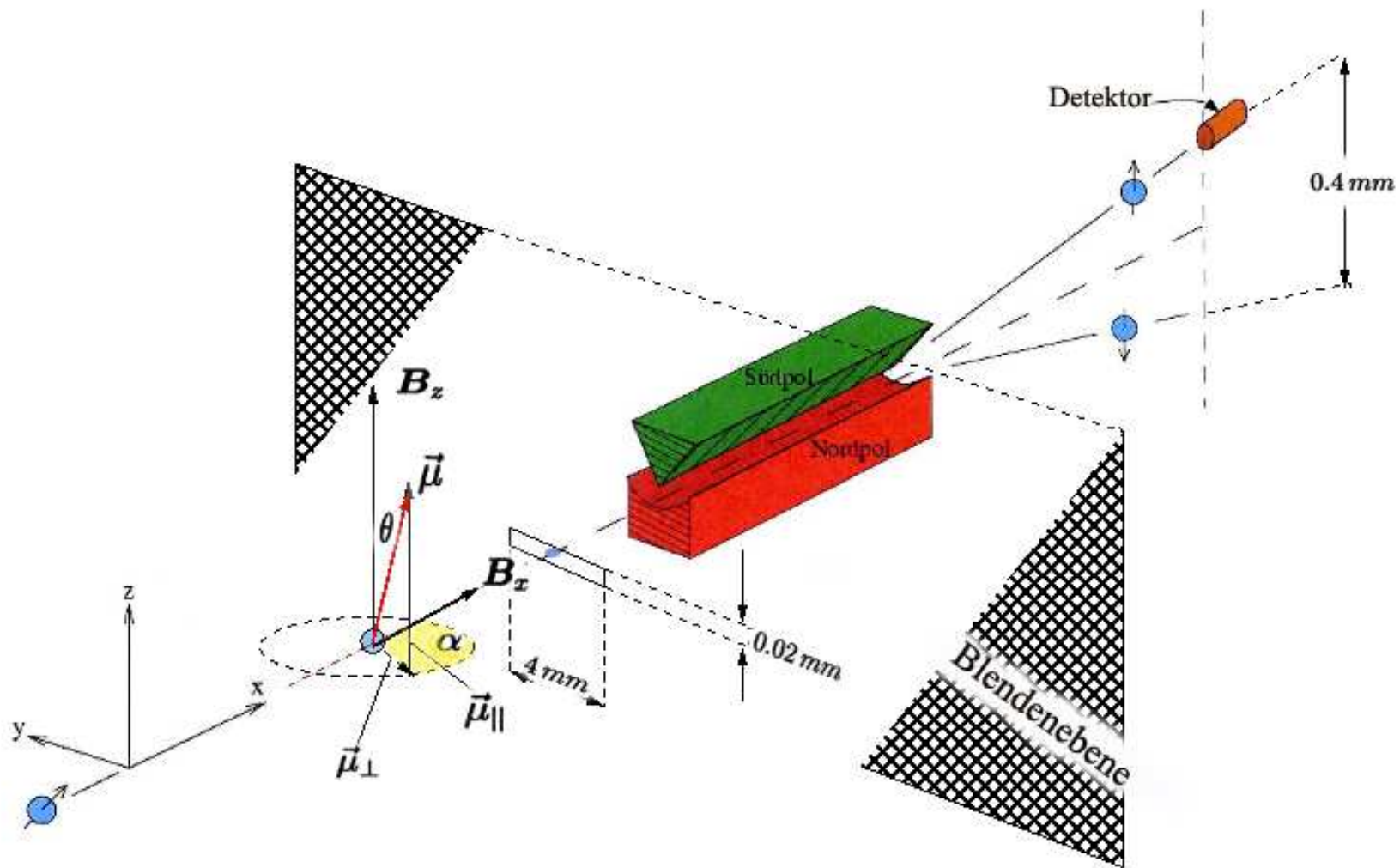


↑
Stirnseite des Magneten



Ungefäherer Verlauf der Feldkomponenten
vor dem Stern-Gerlach-Magneten





Wenn es zu einer Ausrichtung der atomaren Spinmomente bzgl. der z -Richtung kommt, dann muss von dem Streufeld ein Drehmoment M_z ausgeübt werden. Diese Spin-Drehimpulsänderung \dot{L}_z des Valenzelektrons infolge des Drehmoments $\vec{M}_z = \vec{\mu}_\perp \times \vec{B}_x$ ist gegeben durch $M_z = \dot{L}_z$, d. h. durch

$$\dot{L}_z = \mu_\perp \underbrace{f_{gxx} x}_{=B_x(x)} \sin(\overbrace{\omega_L t + \alpha_0}^{=\alpha(t)}) . \quad (1)$$

Dabei bezieht sich $\vec{\mu}_\perp$ auf die Komponente $\vec{\mu}$ des atomaren magnetischen Moments senkrecht zum inneren Feld des Stern-Gerlach-Magneten, und α_0 ist der Winkel, den $\vec{\mu}_\perp$ mit der x -Richtung bei Beginn des linearen Anstiegs von B_x einschließt. Wegen der vereinfachenden Annahme, dass B_x von $x = 0$ an linear bis zum Eintritt in den Magneten zunehmen soll, gilt:

$$B_x(x) = f_{gxx} x , \quad (2)$$

wo $f_{gxx} = \frac{\partial}{\partial x} B_x$ den Feldgradienten von B_x in x -Richtung bezeichnet. Das Intervall Δx , über das sich dieser lineare Feldanstieg erstreckt, habe die geschätzte Länge

$$\Delta x = 0.5 \text{ cm} .$$

Die Larmor-Frequenz ω_L , mit der der Elektronenspin um die Richtung der (durchweg stärkeren) Feldkomponente B_z präzediert, ist definiert durch

$$\hbar \omega_L = 2\mu_B B_z; \quad \mu_B = \text{Bohrsches Magneton.} \quad (3)$$

Vor Eintritt in den Stern-Gerlach-Magneten nimmt auch diese Feldkomponente als Funktion von x (stark vereinfacht) linear zu:

$$B_z(x) = f_{gzx} x. \quad (4)$$

Wenn sich das spin-tragende Atom mit der Geschwindigkeit v_{at} auf den Magneten zubewegt, dann gilt:

$$x = v_{at} t.$$

Dies in Glg.(1) eingesetzt liefert

$$\dot{L}_z = \mu_{\perp} f_{gxx} v_{at} t \sin(\omega_L t + \alpha_0), \quad (5)$$

oder nach Zeitintegration

$$\Delta L_z = \int_0^T \dot{L}_z dt = \sum_{\nu=1}^n \mu_{\perp}(\nu) f_{gxx} v_{at} \frac{1}{\omega_L^2(\nu)} \int_{\xi_{\nu-1}}^{\xi_{\nu}} \xi \sin(\xi + \alpha_0) d\xi \quad (6)$$

$$\text{mit } \xi_{\nu} = \nu 2\pi; \quad \nu = 1, 2, \dots, \quad \text{d.h. } \omega_L(\nu) t_{\nu} = \nu 2\pi. \quad (7)$$

$$\Delta L_z = \int_0^T \dot{L}_z dt = \sum_{\nu=1}^n \mu_{\perp}(\nu) f_{gxx} v_{at} \frac{1}{\omega_L^2(\nu)} \int_{\xi_{\nu-1}}^{\xi_{\nu}} \xi \sin(\xi + \alpha_0) d\xi \quad (6)$$

$$\text{mit } \xi_{\nu} = \nu 2\pi; \quad \nu = 1, 2, \dots, \quad \text{d.h. } \omega_L(\nu) t_{\nu} = \nu 2\pi. \quad (7)$$

Hier ist das Zeitintervall der Gesamtlänge T in n Teilintervalle der Länge $T_L(\nu) = \frac{2\pi}{\omega_L(\nu)}$ zerlegt worden, wobei $T_L(\nu)$ die Dauer der Präzession im ν -ten Teilintervall bezeichnet. Der Zeit-Ursprung ist auf den Zeitpunkt festgelegt, zu dem das betreffende Atom den Punkt $x = 0$ passiert. Man erkennt, dass ΔL_z nur dann von Null verschieden werden kann, wenn in dem Integral von Glg.(6) vor dem Sinus der Faktor ξ auftritt. Deshalb kann es zu einer z -Orientierung des Drehimpulses nur in einem ortsabhängigen "Störfeld" $B_x(\mathbf{r})$ kommen.

Nun ist

$$\int_{\xi_{\nu}}^{\xi_{\nu}+2\pi} \xi \sin(\xi + \alpha_0) d\xi = -2\pi \cos \alpha_0. \quad (8)$$

$$\int_{\xi_\nu}^{\xi_\nu+2\pi} \xi \sin(\xi + \alpha_0) d\xi = -2\pi \cos \alpha_0 . \quad (8)$$

Der Winkel α_0 , mit dem die verschiedenen Atome nacheinander in das Streufeld eintreten, ist statistisch gleichmäßig über das Intervall $(0, 2\pi]$ verteilt. Atome, die mit einem Winkel α_0 zwischen $\frac{\pi}{2}$ und $\frac{3\pi}{2}$ in das Streufeld eintreten, erfahren eine Zunahme ihres Spin-Drehimpulses in z -Richtung und werden innerhalb des Magneten nach oben abgelenkt. Bei der (statistisch) anderen Hälfte der Atome mit $-\frac{\pi}{2} < \alpha_0 \leq \frac{\pi}{2}$ ist ΔL_z negativ, d. h. ihr Spin-Drehimpuls wird in Richtung der negativen z -Achse aufgebaut, und deshalb werden diese Atome innerhalb des Magneten nach unten abgelenkt.

Die Auftrennung des Atomstrahls in zwei Teilstrahlen hat also seine Ursache **nicht** in der **anfänglichen Orientierung** des atomaren Spins **bzgl. der Feldrichtung im Inneren des Stern-Gerlach-Magneten!**

Mittelt man $\cos \alpha_0$ über das Intervall $(\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}]$, aus dem Atome im Magneten nach oben abgelenkt werden, dann erhält man für das Integral von Glg.(8)

$$\frac{1}{\pi} \int_{\pi/2}^{3\pi/2} \left[\int_{\xi_\nu}^{\xi_\nu + 2\pi} \xi \sin(\xi + \alpha_0) d\xi \right] d\alpha_0 = 4.$$

Damit nimmt Glg.(6) die Form an:

$$\Delta L_z = \sum_{\nu=1}^n \Delta L_z(\nu)$$

mit

$$\Delta L_z(\nu) = 4 f_{gxx} v_{at} \mu_{\perp}(\nu) \frac{1}{\omega_L^2(\nu)} \Delta\nu, \quad (9)$$

wobei aus formalen Gründen ein Faktor $\Delta\nu = 1$ hinzugefügt worden ist.

Aus den Gln.(2), (3) und (7) folgt

$$\omega_L(\nu) t_\nu = \nu 2\pi = \frac{2 \mu_\perp(\nu) f_{gzx} \overbrace{x_\nu}^{=v_{at} t_\nu}}{\hbar} t_\nu,$$

und daher wird

$$t_\nu^2 = \frac{\pi \hbar}{\mu_\perp(\nu) f_{gzx} v_{at}} \nu, \quad \text{also} \quad 2t_\nu \Delta t_\nu = \frac{\pi \hbar}{\mu_\perp(\nu) f_{gzx} v_{at}} \underbrace{\Delta \nu}_{=1}. \quad (10)$$

Damit ergibt sich für $\Delta \nu$

$$\Delta \nu = \frac{2 \mu_\perp(\nu) f_{gzx} v_{at}}{\pi \hbar} t_\nu \Delta t_\nu.$$

Setzt man dies in in Glg.(9) ein:

$$\Delta L_z(\nu) = 4 f_{gxx} v_{at} \mu_{\perp}(\nu) \frac{1}{\omega_L^2(\nu)} \Delta\nu,$$

und beachtet noch

$$\omega_L(\nu) = \frac{2 \mu_{\perp}(\nu) f_{gzx} v_{at}}{\hbar} t_{\nu}, \quad \text{also} \quad \frac{1}{\omega_L(\nu)^2} = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{[\mu_{\perp}(\nu) f_{gzx} v_{at}]^2} \frac{1}{t_{\nu}^2},$$

dann erhält man

$$\Delta L_z(\nu) = \frac{2 \hbar}{\pi} \frac{f_{gxx}}{f_{gzx}} \frac{1}{t_{\nu}} \Delta t_{\nu}.$$

Demnach wird

$$\frac{\Delta L_z}{\hbar} = \sum_{\nu=1}^n \frac{\Delta L_z(\nu)}{\hbar} = \frac{2}{\pi} \frac{f_{gxx}}{f_{gzx}} \sum_{\nu=1}^n \frac{1}{t_{\nu}} \Delta t_{\nu}. \quad (11)$$

$$\frac{\Delta L_z}{\hbar} = \sum_{\nu=1}^n \frac{\Delta L_z(\nu)}{\hbar} = \frac{2}{\pi} \frac{f_{gxx}}{f_{gzx}} \sum_{\nu=1}^n \frac{1}{t_\nu} \Delta t_\nu .$$

Der Ausdruck $\frac{\Delta L_z}{\hbar}$ muss spätestens in der Zeit T , in der die Atome das Streufeld durchfliegen, gleich Eins werden, damit das Ergebnis des Stern-Gerlach-Versuchs erklärt werden kann.

Die rechts stehende Summe zerlegt man vorteilhaft in der Form

$$\sum_{\nu=1}^n \frac{1}{t_\nu} \Delta t_\nu = \sum_{\nu=1}^{n_0-1} \frac{1}{t_\nu} \Delta t_\nu + \sum_{\nu=n_0}^n \frac{1}{t_\nu} \Delta t_\nu ,$$

wobei $n_0 - 1$ die Zahl der ersten Präzessionsperioden in einem noch kleinem Streufeld bezeichnet, das noch keine wesentliche Veränderung in der Spinorientierung bewirkt hat. Die zweite Summe kann näherungsweise durch ein Integral dargestellt werden

$$\sum_{\nu=n_0}^n \frac{1}{t_\nu} \Delta t_\nu = \int_{t_0}^T \frac{dt}{t} = \ln \frac{T}{t_0} .$$

$$\sum_{\nu=n_0}^n \frac{1}{t_\nu} \Delta t_\nu = \int_{t_0}^T \frac{dt}{t} = \ln \frac{T}{t_0}.$$

Dabei ist t_0 im Sinne der Näherung, die der Glg.(10) zugrunde liegt, folgendermaßen festgelegt:

$$2 t_0 \Delta t_\nu = \frac{\pi \hbar}{\mu_\perp (\nu) f_{gzx} v_{at}}. \quad (13)$$

Die Näherung bestand in der Annahme

$$\Delta (t_\nu^2)|_{t_0} \approx 2 t_0 \Delta t_\nu, \quad \text{also} \quad \frac{\Delta t_\nu}{t_0} = \epsilon \quad \text{mit} \quad \epsilon \ll 1,$$

und wir betrachten hier

$$\epsilon = \frac{1}{10}$$

als ausreichend klein. Damit nimmt wegen $2 t_0 \Delta t_\nu = 2 \epsilon t_0^2$ Glg. (13) die Form an

$$t_0 = \sqrt{\frac{5 \pi \hbar}{\mu_\perp (\nu) f_{gzx} v_{at}}}. \quad (14)$$

Nun ist

$$f_{gzx} v_{at} = 1T \text{ cm}^{-1} \cdot 10^5 \text{ cm s}^{-1} = 10^5 T \text{ s}^{-1}$$

und

$$\mu_{\perp}^{max} = \mu_B = 5.79 \cdot 10^{-5} \text{ eV T}^{-1}; \quad 5 \pi \hbar = 10^{-14} \text{ eV s}.$$

Also wird

$$\frac{5 \pi \hbar}{\mu_{\perp}(\nu) f_{gzx} v_{at}} = \frac{1}{5.79} 10^{-14} \text{ s}^2 = 17.3 \cdot 10^{-16} \text{ s}^2 \quad \hookrightarrow t_0 = 4.16 \cdot 10^{-8} \text{ s}.$$

Das Durchfliegen des Streufelds von der Ausdehnung $\Delta x = 0.5 \text{ cm}$ erfordert eine Zeit T

$$T = \frac{0.5 \text{ cm}}{10^5 \text{ cm s}^{-1}} = 5 \cdot 10^{-6} \text{ s}.$$

Damit wird

$$\ln \frac{T}{t_0} = \ln \frac{500}{4.16} = 4.79,$$

und also ergibt sich mit Verwendung von Glg.(12) für die rechte Seite von Glg.(11) unter der Annahme

$$f_{gzx} \approx 2 f_{gxx} \quad \text{und} \quad \mu_{\perp} = \mu_{\perp}^{max} = \mu_B$$

$$\frac{2}{\pi} \frac{f_{gxx}}{f_{gzx}} \sum_{\nu=1}^n \frac{1}{t_{\nu}} \Delta t_{\nu} \approx \frac{2}{\pi} \frac{f_{gxx}}{f_{gzx}} \ln \frac{T}{t_0} = \frac{1}{\pi} 4.79 \approx 1.5.$$

Ist μ_{\perp} um den (positiven) Faktor $q < 1$ kleiner als μ_B , dann gilt

$$t_0 = t_0^{min} / \sqrt{q},$$

wo t_0^{min} die bisher mit t_0 bezeichnete Zeit bedeutet wenn man in Glg.(14) μ_{\perp} mit μ_B identifiziert, also mit dem Maximalwert, den μ_{\perp} annehmen kann.

Nun ist

$$\frac{1}{\pi} \ln \frac{T}{t_0} = \frac{1}{\pi} \ln \frac{T \sqrt{q}}{t_0^{min}} = \underbrace{\frac{1}{\pi} \ln \frac{T}{t_0^{min}}}_{=1.5} + \frac{1}{\pi} \ln \sqrt{q}.$$

Da für eine vollständige Orientierung aller Momente in z -Richtung mindestens $\frac{\Delta L_z}{\hbar} = 1$ zu fordern ist, muss also gelten

$$\frac{1}{\pi} \ln \sqrt{q} \equiv \frac{0.5}{\pi} \ln q = -0.5,$$

das heißt

$$q = e^{-\pi} \quad \hookrightarrow \quad q = \mathbf{0.04}.$$

Wenn ein Atom in das Streufeld einfliegt und sein magnetisches Moment dabei den Winkel θ mit der z -Richtung einschließt, dann ist

$$\mu_{\perp} = \mu_B \underbrace{\sin \theta}_{=q}.$$

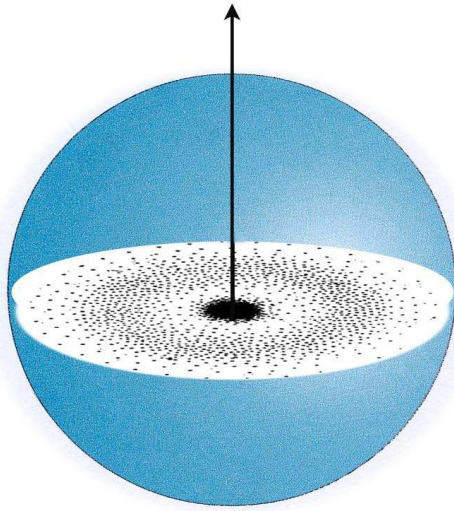
Der kleinste Winkel θ_{min} , von dem ab eine vollständige Orientierung nicht mehr stattfindet, ist also gegeben durch

$$\theta_{min} = \arcsin 0.04 \quad \hookrightarrow \quad \theta_{min} = 2.4^{\circ}.$$

Es ist aber zu beachten, dass die Ablenkung im inhomogenen Feld des Stern-Gerlach-Magneten proportional zu

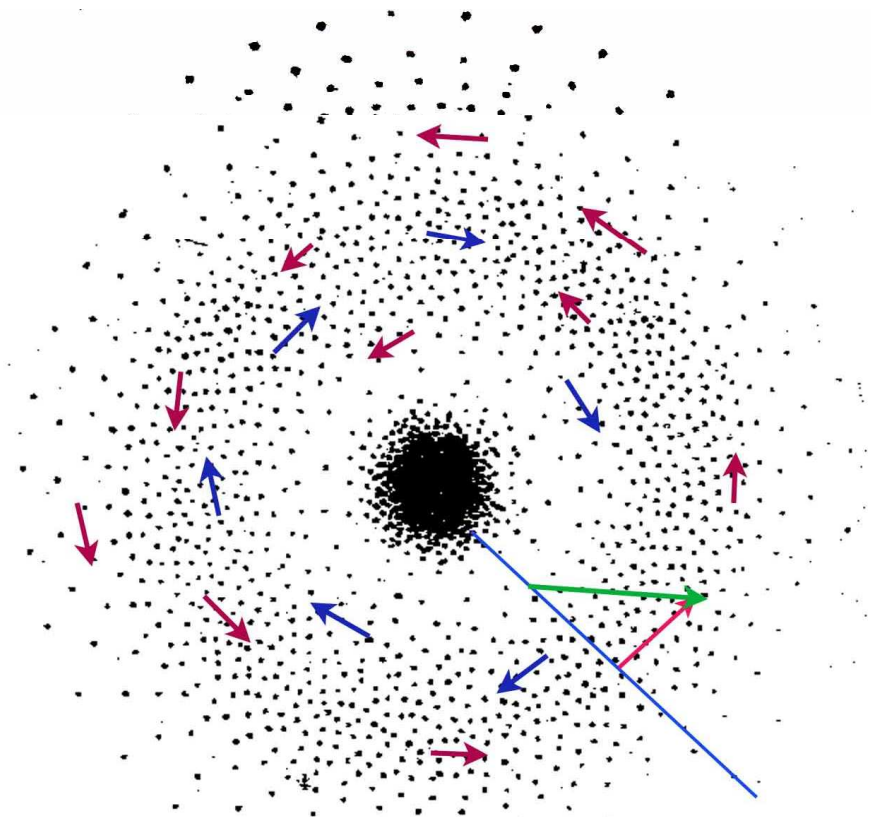
$$\mu_{\parallel} = \mu_B \cos \theta \quad \hookrightarrow \quad \mu_{\parallel}(\theta_{min}) = 0.999 \mu_B$$

ist, also nur 0.1% kleiner als bei kompletter Ausrichtung. Das heißt, die unvollständige Restorientierung wirkt sich in praxi nicht aus.



Im folgenden untersuchen wir den Ursprung des Teilchenspins und dessen Verhalten im Magnetfeld

Wir beschränken uns auf den einfachsten Fall des Elektrons in einem Wasserstoffatom, im Bild als blaue Kugel schematisiert. Auf dem weiß gezeichneten Querschnitt deuten die Punkte Positionen an, die das Elektron sehr schnell nacheinander annimmt. Die Punkteverteilung soll der des 1s-Grundzustands entsprechen. Da das Elektron in keinem der Punkte ruht, sondern unter der Wirkung stochastischer Vakuumkräfte eine Art Zitterbewegung ausführt, ist diese Bewegung im nächsten Bild durch Pfeile angedeutet.



In der Zeichnung ist eine Achse durch das Atomzentrum und senkrecht zur Zeichenebene ausgezeichnet worden, zunächst noch willkürlich. Später soll sie mit der Richtung eines magnetischen Feldes übereinstimmen. Der grüne Pfeil steht symbolisch für die momentane Geschwindigkeit zu irgendeinem Zeitpunkt. Diese Geschwindigkeit wird in eine (rote bzw. blaue) Komponente senkrecht zu der ausgezeichneten Achse zerlegt und in einen Restvektor, der für die weiteren Überlegungen keine Rolle spielen wird. Aufgrund des stochastischen Charakters treten rote und blaue Pfeile im Mittel gleich oft auf. Die Untermengen von roten bzw. blauen Pfeilen beschreiben Situationen des Elektrons zu positiven bzw. negativen Drehimpuls, den wir mit dem Spin des Elektrons identifizieren.

Zerlegung der Wahrscheinlichkeitsdichte in spinklassifizierte Teildichten

$$\rho(\mathbf{r}) = |a|^2 \rho_{\uparrow}(\mathbf{r}) + |b|^2 \rho_{\downarrow}(\mathbf{r})$$

Die Teildichten sollen einzeln auf eins normiert sein:

$$\int_{\mathcal{V}} \rho_{\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r}) d^3r = 1.$$

Dann folgt:

$$|a|^2 + |b|^2 = 1.$$

Eine Abbildung der Zerlegung der Wahrscheinlichkeitsdichte auf eine Zerlegung der Wellenfunktion:

$$\psi(\mathbf{r}) = a \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) + b \psi_{\downarrow}(\mathbf{r})$$

ist *nicht* möglich, da

$$\rho(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \underbrace{a^* \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{r}) a \psi_{\uparrow}(\mathbf{r})}_{=|a|^2 \rho_{\uparrow}(\mathbf{r})} + \underbrace{b^* \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{r}) b \psi_{\downarrow}(\mathbf{r})}_{=|b|^2 \rho_{\downarrow}(\mathbf{r})} + (\text{Mischterme} \neq 0).$$

Ersetzt man aber $\psi(\mathbf{r})$ durch einen zwei-komponentigen Spaltenvektor $\underline{\psi}(\mathbf{r})$ (»Spinor«)

$$\underline{\psi}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} a \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ b \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = a \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

mit

$$\int_{\mathcal{V}} |\psi_{\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1$$

und ersetzt entsprechend $\psi^*(\mathbf{r})$ durch den zwei-komponentigen Zeilenvektor $\underline{\psi}^+(\mathbf{r})$ (den »adjungierten Spinor«)

$$\underline{\psi}^+(\mathbf{r}) = (a^* \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{r}), b^* \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{r})) ,$$

dann wird wunschgemäß:

$$\underline{\psi}^+(\mathbf{r}) \underline{\psi}(\mathbf{r}) = a^* a \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) + b^* b \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) .$$

Wegen

$$\int_{\mathcal{V}} \rho(\mathbf{r}) d^3r = 1 \quad \text{folgt für die Normierung des Spinors:}$$

$$\int_{\mathcal{V}} \underline{\psi}^+(\mathbf{r}) \underline{\psi}(\mathbf{r}) d^3r = 1.$$

Wir betrachten jetzt das Atom in einem homogenen magnetischen Feld in der Richtung, die wir durch die Wahl der Spinororientierung (die z-Richtung) festgelegt haben $\mathbf{B} = B_z \mathbf{e}_z$.

Die zu \uparrow bzw. \downarrow gehörenden Dichten der magnetischen Wechselwirkungsenergie sind dann, wenn wir das Bohrsche Magneton μ_B aus experimentellem Befund als bekannt voraussetzen:

$$-\mu_B B_z |a|^2 \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \quad \text{bzw.} \quad + \mu_B B_z |b|^2 \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}).$$

Also ist die gesamte magnetische Wechselwirkungs-Energiedichte :

$$-\mu_B B_z \left(a^* \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{r}) a \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) - b^* \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{r}) b \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \right).$$

$$u_{magn.}(\mathbf{r}) = -\mu_B B_z \left(a^* \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{r}) a \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) - b^* \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{r}) b \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \right) .$$

Die Schreibweise dieses Ausdrucks lässt sich sehr vereinfachen, wenn wir B_z formal durch eine Matrix ersetzen:

$$\underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} .$$

Da $\underline{\psi}(\mathbf{r})$ eingeführt war als

$$\underline{\psi}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} a \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ b \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = a \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

Also kann man $u_{magn.}(\mathbf{r})$ schreiben in der Form:

$$u_{magn.}(\mathbf{r}) = -\underline{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \mu_B \underline{\underline{B}} \underline{\psi}(\mathbf{r}) .$$

Ebenso kann man den analogen Ausdruck

$$a^* \psi_{\uparrow}^*(\underline{r}) \hat{H} a \psi_{\uparrow}(\underline{r}) + b^* \psi_{\downarrow}^*(\underline{r}) \hat{H} b \psi_{\downarrow}(\underline{r})$$

in der Form schreiben:

$$\underline{\psi}^+(\underline{r}) \hat{H} \underline{\psi}(\underline{r}).$$

Dabei ist \hat{H} der Hamilton-Operator des Elektrons im Magnetfeld zum Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2}{2m_0} + V(\mathbf{r})$$

Demnach wird der Erwartungswert der Gesamtenergie bei Anwesenheit eines Magnetfeldes

$$\langle \hat{H}' \rangle = \langle \hat{H} \rangle + \int_{\mathcal{V}} u_{magn.}(\mathbf{r}) d^3r,$$

$$\langle \hat{H}' \rangle = \langle \hat{H} \rangle + \int_{\mathcal{V}} u_{magn.}(\mathbf{r}) d^3r,$$

was sich also in der Form schreiben lässt:

$$\langle \hat{H}' \rangle = \int_{\mathcal{V}} \underline{\psi}^+(\mathbf{r}) \left\{ \underline{\hat{H}} - \mu_B \underline{B} \right\} \underline{\psi}(\mathbf{r}) d^3r$$

mit

$$\underline{\hat{H}} = \hat{H} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

In der nicht-relativistischen Quantenmechanik ohne Spin machen Eigenzustände $\psi_n(\mathbf{r})$ den Erwartungswert des Hamilton-Operators zum Extremum, und die Schrödinger-Gleichung stellt daher die Euler-Lagrange-Gleichung des zugehörigen Extremalproblems dar.

Fordert man im vorliegenden Falle mit Spin ganz analog, dass $\underline{\psi}(\mathbf{r})$ den Erwartungswert $\langle \hat{H}' \rangle$ zum Extremum machen soll, dann ergibt sich als Euler-Lagrange-Gleichung die nicht-relativistische Pauli-Gleichung:

$$\left(\underline{\underline{\hat{H}}} - \mu_B \underline{\underline{B}} \right) \underline{\underline{\psi}}(\mathbf{r}) = E \underline{\underline{\psi}}(\mathbf{r})$$

$$\text{mit } \hat{H} = \frac{1}{2m_0} [\hat{\mathbf{p}} - e \mathbf{A}(\mathbf{r})]^2 + V(\mathbf{r}).$$

Es lässt sich zeigen, dass die Gleichung im zeitabhängigen Falle die Form annimmt:

$$\left[\underline{\underline{\hat{H}}}(\mathbf{r}) - \mu_B \underline{\underline{B}} \right] \underline{\underline{\psi}}(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{\underline{\psi}}(\mathbf{r}, t).$$

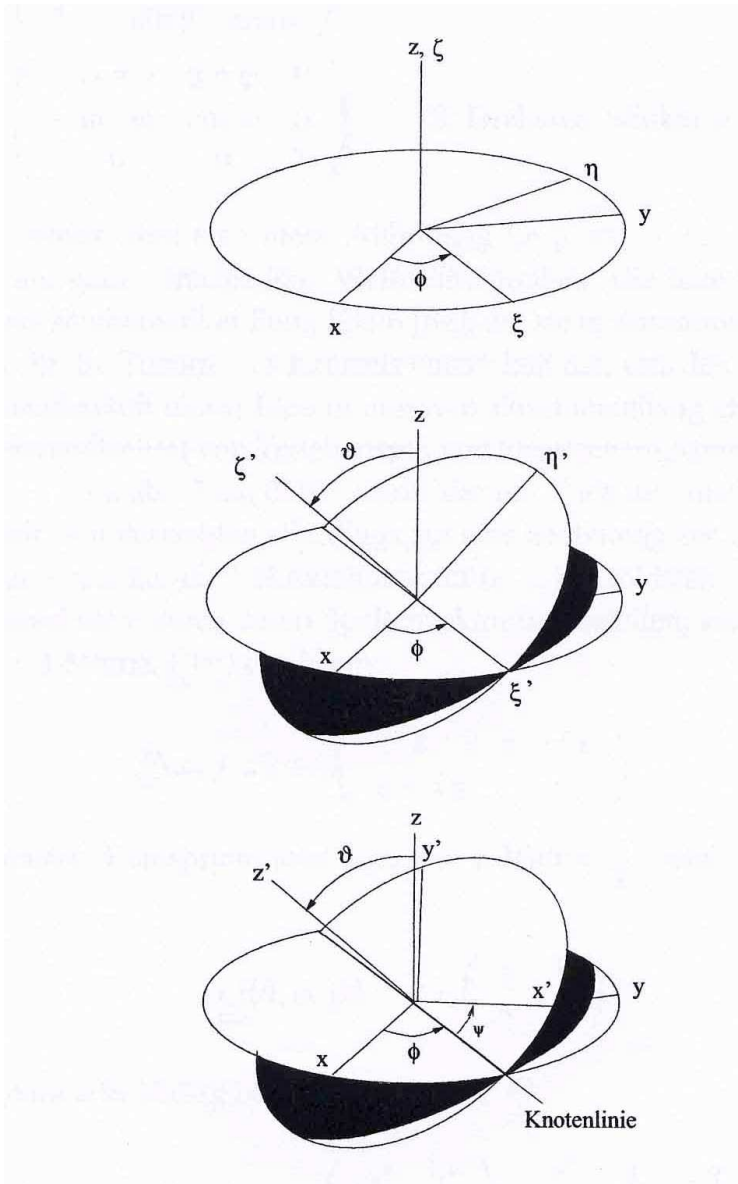
Die Cayley-Kleinschen Parameter, Paulische Spinmatrizen

Üblicherweise beschreibt man die Drehung eines Koordinatensystems in der Form:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \underline{\underline{A}} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} .$$

Dabei bezeichnet der Spaltenvektor \mathbf{r}' im gedrehten Koordinatensystem denselben Punkt, der im ursprünglichen Koordinatensystem durch den Ortsvektor \mathbf{r} gekennzeichnet ist, und $\underline{\underline{A}}$ ist die zugehörige orthogonale Drehmatrix.

Man kann zur Kennzeichnung der Drehung die drei Eulerschen Winkel ϕ, θ, ψ einführen, die eine Drehung in drei Schritten beschreiben:



$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{B}} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{D}}$$

$$\underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

1. Drehung: Winkel ϕ um z

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

2. Drehung: Neigung der z -Achse um θ

$$\underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

3. Drehung: Winkel ψ um z'

Verblüffenderweise lässt sich diese Abbildung $(x, y, z) \rightarrow (x', y', z')$ völlig äquivalent, aber auf ganz verschiedene Weise beschreiben. Die Idee hierzu stammt Felix Klein (1910).

Statt den Ortsvektor \mathbf{r} durch einen Spaltenvektor darzustellen, kennzeichnet man ihn durch die 2×2 -Matrix $\underline{\underline{P}}(\mathbf{r})$ der Form:

$$\underline{\underline{P}}(x, y, z) := \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix}$$

Der 3×3 -Matrix $\underline{\underline{A}}$ entspricht jetzt eine 2×2 -Matrix $\underline{\underline{Q}}$, welche konkret die Form hat:

$$\underline{\underline{Q}}(\theta, \phi, \psi) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

Die zu $\underline{\underline{Q}}$ adjungierte Matrix sei mit $\underline{\underline{Q}}^+$ bezeichnet:

$$\underline{\underline{Q}}^+(\theta, \phi, \psi) = \begin{pmatrix} \alpha^* & \gamma^* \\ \beta^* & \delta^* \end{pmatrix}$$

Die Matrixelemente $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ ergeben sich aus der Herleitung (s. z. B. H. Goldstein: *Klassische Mechanik*) zu :

$$\begin{aligned}\alpha &= e^{\frac{i}{2}(\psi+\phi)} \cos \frac{\theta}{2} \\ \beta &= i e^{\frac{i}{2}(\psi-\phi)} \sin \frac{\theta}{2} \\ \gamma &= i e^{-\frac{i}{2}(\psi-\phi)} \sin \frac{\theta}{2} \\ \delta &= e^{-\frac{i}{2}(\psi+\phi)} \cos \frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

Sie heißen »*Cayley-Kleinsche Parameter*«

Felix Klein zeigt nun, dass

$$\underline{\underline{P'}}(x', y', z') = \underline{\underline{Q}} [\underline{\underline{P}}(x, y, z)] \underline{\underline{Q}}^+ = \begin{pmatrix} z' & x' - i y' \\ x' + i y' & -z' \end{pmatrix}$$

genau die gleiche Transformation liefert wie $\mathbf{r}' = \underline{\underline{A}} \mathbf{r}$ mit der weiter oben festgelegten Bedeutung von $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{B}} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{D}}$.

Die Matrix $\underline{\underline{B}}$ war eingeführt worden in der Form:

$$\underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} = B_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

In Kleinscher Darstellung hat der Punkt $\mathbf{r} = (0, 0, z)$ die analoge Form:

$$\underline{\underline{P}} = \begin{pmatrix} z & 0 \\ 0 & -z \end{pmatrix}$$

Konsequenterweise ist also zu fordern, dass sich $\underline{\underline{B}}$ unter Drehung des Koordinatensystems wie der Vektor \mathbf{B} transformieren soll, d.h. analog zu $\underline{\underline{P}}$:

$$\underline{\underline{B'}} = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{B}} \underline{\underline{Q}}^+.$$

In allgemeiner Lage des Koordinatensystems hat dann $\underline{\underline{B'}}$ die zu $\underline{\underline{P'}}$ analoge Form, wenn man den oberen Strichindex zur Vereinfachung wieder weglässt:

$$\underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} B_z & B_x - i B_y \\ B_x + i B_y & -B_z \end{pmatrix}.$$

$$\underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} B_z & B_x - i B_y \\ B_x + i B_y & -B_z \end{pmatrix}$$

Diese Matrix lässt sich in der folgenden Weise zerlegen:

$$\underline{\underline{B}} = B_x \underline{\underline{\sigma}}_x + B_y \underline{\underline{\sigma}}_y + B_z \underline{\underline{\sigma}}_z,$$

wobei die drei Matrizen auf der rechten Seite die Form haben:

$$\underline{\underline{\sigma}}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{\sigma}}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{\sigma}}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

später als »*Spinmatrizen*« bezeichnet (Pauli 1927)

Üblicherweise fasst man sie zu einem Vektor zusammen:

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{\sigma}}_x \\ \underline{\underline{\sigma}}_y \\ \underline{\underline{\sigma}}_z \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \vec{\sigma} = \underline{\underline{\sigma}}_x \mathbf{e}_x + \underline{\underline{\sigma}}_y \mathbf{e}_y + \underline{\underline{\sigma}}_z \mathbf{e}_z.$$

Damit kann man die Matrix

$$\underline{\underline{B}} = B_x \underline{\underline{\sigma}}_x + B_y \underline{\underline{\sigma}}_y + B_z \underline{\underline{\sigma}}_z$$

formal als Skalarprodukt zweier Vektoren schreiben:

$$\underline{\underline{B}} = \mathbf{B} \cdot \vec{\sigma}.$$

Anstelle von

$$\left[\underline{\underline{\hat{H}}}(\mathbf{r}) - \mu_B \underline{\underline{B}} \right] \underline{\underline{\psi}}(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{\underline{\psi}}(\mathbf{r}, t)$$

hat man also bei allgemeiner Lage von \mathbf{B} :

$$\left(\underline{\underline{\hat{H}}} - \mu_B \mathbf{B} \cdot \vec{\sigma} \right) \underline{\underline{\psi}}(\mathbf{r}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{\underline{\psi}}(\mathbf{r}).$$

Da sich die Wechselwirkungs-Energiedichte bei einer Drehung des Koordinatensystems natürlich nicht ändert, ist zu verlangen:

$$u_{mag}(\mathbf{r}) = u'_{mag}(\mathbf{r}') \quad \text{d. h.} \quad -\underline{\psi}^+(\mathbf{r}) \mu_B \underline{\underline{B}} \underline{\psi}(\mathbf{r}) = -\underline{\psi}'^+(\mathbf{r}') \mu_B \underline{\underline{B}}' \underline{\psi}'(\mathbf{r}').$$

Man kann sehr leicht zeigen, dass dies gewährleistet, wenn

$$\underline{\psi}' = \underline{\underline{Q}} \underline{\psi} \quad \text{und entsprechend} \quad \underline{\psi}'^+ = \left(\underline{\underline{Q}} \underline{\psi} \right)^+ = \underline{\psi}^+ \underline{\underline{Q}}^+.$$

Zur Beschreibung der Spinorientierung in einem Magnetfeld sind die beiden Winkel θ und ϕ ausreichend. Man kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit den Winkel ψ speziell wählen. Es empfiehlt sich, $\psi = -\pi/2$ zu setzen. Die Projektion des Einheitsvektors \mathbf{e}'_z in die ursprüngliche x/y -Ebene schließt mit der x -Achse einen Winkel φ ein, der mit dem Eulerwinkel ϕ in der Beziehung steht:

$$\phi = \varphi + \frac{\pi}{2}.$$

Dann nimmt Q die meist benutzte Form an:

$$\underline{\underline{Q}}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{2}\varphi(\mathbf{r})\right] \cos \frac{\theta(\mathbf{r})}{2} & \exp\left[-\frac{i}{2}\varphi(\mathbf{r})\right] \sin \frac{\theta(\mathbf{r})}{2} \\ -\exp\left[\frac{i}{2}\varphi(\mathbf{r})\right] \sin \frac{\theta(\mathbf{r})}{2} & \exp\left[-\frac{i}{2}\varphi(\mathbf{r})\right] \cos \frac{\theta(\mathbf{r})}{2} \end{pmatrix}.$$

Die Überlegung, mit der wir die Einführung des Teilchenspinors $\psi(\mathbf{r})$ begründet haben und die uns eine Darstellung der Wechselwirkung mit dem äußeren Magnetfeld in der einfachen Form

$$\mu_B B_z \int [|a|^2 |\psi_{\uparrow}(\mathbf{r})|^2 - |b|^2 |\psi_{\downarrow}(\mathbf{r})|^2] d^3 r$$

lieferte, erlaubt uns, in ganz analoger Form auch den Erwartungswert des spinartigen Drehimpulses anzugeben:

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \int [|a|^2 |\psi_{\uparrow}(\mathbf{r})|^2 - |b|^2 |\psi_{\downarrow}(\mathbf{r})|^2] d^3 r.$$

Dabei betrachten wir den Betrag $\frac{\hbar}{2}$ des Spin-Drehimpulses ebenfalls als einen experimentellen Befund.

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \int [|a|^2 |\psi_{\uparrow}(\mathbf{r})|^2 - |b|^2 |\psi_{\downarrow}(\mathbf{r})|^2] d^3 r .$$

Dieser Ausdruck lässt sich mit Hilfe einer zu $\underline{\underline{B}}_z$ analogen Matrix

$$\underline{\underline{S}}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

wieder kompakt in der Form schreiben:

$$\langle S_z \rangle = \int \underline{\psi}^+(\mathbf{r}) \underline{\underline{S}}_z \underline{\psi}(\mathbf{r}) d^3 r .$$

Wenn $\underline{\psi}(\mathbf{r})$ die Form hat:

$$\underline{\psi}(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \psi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} ,$$

dann wird ersichtlich

$$\langle S_z \rangle = \int \underline{\psi}^+(\mathbf{r}) \underline{\underline{S}}_z \underline{\psi}(\mathbf{r}) d^3 r = \pm \frac{\hbar}{2} .$$

In allgemeiner Lage gilt dann analog zu der Transformation von $\underline{\underline{B}}_z$

$$\underline{\underline{S}}_{z'} = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{S}}_z \underline{\underline{Q}}^+.$$

$\underline{\underline{S}}_{z'}$ lässt sich analog zu $\underline{\underline{B}}_{z'} = \mathbf{B} \cdot \vec{\sigma} = B_x \underline{\underline{\sigma}}_x + B_y \underline{\underline{\sigma}}_y + B_z \underline{\underline{\sigma}}_z$ schreiben in der Form

$$\underline{\underline{S}}_{z'} = \frac{\hbar}{2} [\hat{\alpha}_x \underline{\underline{\sigma}}_x + \hat{\alpha}_y \underline{\underline{\sigma}}_y + \hat{\alpha}_z \underline{\underline{\sigma}}_z].$$

Dabei sind $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$ die Komponenten des Einheitsvektors $\mathbf{e}_{z'}$ in Richtung der z' -Achse:

$$\hat{\alpha}_x = \cos \varphi \sin \theta$$

$$\hat{\alpha}_y = \sin \varphi \sin \theta$$

$$\hat{\alpha}_z = \cos \theta.$$

Es empfiehlt sich, einen zu $\vec{\sigma}$ analogen Vektor \vec{S} zu definieren durch die Festsetzung:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \gg \textit{Spinoperator} \ll.$$

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}.$$

Damit lässt sich die Beziehung

$$\underline{S}_{z'} = \frac{\hbar}{2} [\hat{\alpha}_x \underline{\sigma}_x + \hat{\alpha}_y \underline{\sigma}_y + \hat{\alpha}_z \underline{\sigma}_z]$$

in der Form schreiben:

$$\underline{S}_{z'} = \mathbf{e}_{z'} \cdot \vec{S},$$

und damit wird:

$$\langle S_{z'} \rangle = \int \underline{\psi}^+(\mathbf{r}) \underline{S}_{z'} \underline{\psi}(\mathbf{r}) d^3r = \mathbf{e}_{z'} \cdot \langle \vec{S} \rangle$$

wobei $\langle \vec{S} \rangle$ eine Abkürzung ist für den Ausdruck:

$$\langle \vec{S} \rangle = \int \underline{\psi}^+(\mathbf{r}) \vec{S} \underline{\psi}(\mathbf{r}) d^3r.$$

Spin-Präzession im Magnetfeld

Wir wollen den Fall der ungestörten Präzession eines atomaren Spinmoments in einem Magnetfeld beschreiben. Die **Richtung des statischen homogenen Magnetfelds** legen wir in die **z -Achse** eines rechtwinklig-kartesischen Koordinatensystems und beschreiben die **Lage des Spinmoments** in einem gestrichenen Koordinatensystem $x'/y'/z'$, das bzgl. des ungestrichenen Koordinatensystems um die oben eingeführten **Winkel $\theta, \varphi, \psi (= 0)$** gedreht sein soll.

Das Spinmoment liege in Richtung der z' -Achse. Der zugehörige Spinor hat also im gestrichenen Koordinatensystem die Form:

$$\underline{\psi}'(\mathbf{r}') = \underbrace{\psi'_0(\mathbf{r}')}_{\equiv \psi_0(\mathbf{r})} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Im ungestrichenen Koordinatensystem hat der obige Spinor die Form:

$$\underline{\psi}(\mathbf{r}) = \underline{\underline{Q}}^+ \underline{\psi}'(\mathbf{r}') = \underbrace{\psi_0(\mathbf{r}) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2}}_{=\psi_{-0\uparrow}(\mathbf{r})} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \underbrace{\psi_0(\mathbf{r}) e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2}}_{=\psi_{-0\downarrow}(\mathbf{r})} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$\underline{\psi}(\mathbf{r})$ besteht also aus der Summe zweier Spinoren:

$$\underline{\psi}(\mathbf{r}) = \underline{\psi}_{0\uparrow}(\mathbf{r}) + \underline{\psi}_{0\downarrow}(\mathbf{r}).$$

Ohne äußeres Magnetfeld erfüllt jeder der beiden Spinoren die nicht-relativistische zeitunabhängige Pauli-Gleichung für $\mathbf{B} = 0$, da $\psi_0(\mathbf{r})$ der entsprechenden zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung genügen soll.

Ist aber $B_z \neq 0$, dann gehören die beiden Spinoren zu verschiedenen Energien $E_{0\uparrow(\downarrow)} = E_0 \pm \mu_B B_z$, und daher kann ihre Summe jetzt nicht mehr Lösung der zeitunabhängigen Pauli-Gleichung sein. Es gilt nur noch einzeln

$$\left[\underline{\hat{H}}(\mathbf{r}) - \mu_B \underline{B} \right] \underline{\psi}_{0\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r}) = E_{0\uparrow(\downarrow)} \underline{\psi}_{0\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r}).$$

Dagegen befriedigt die Summe der Spinoren

$$\underline{\psi}_{0\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r}, t) = \underline{\psi}_{0\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{0\uparrow(\downarrow)} t}$$

nur die zeitabhängige Pauli-Gleichung mit Magnetfeld.

Man erhält demnach im Magnetfeld bei schräger Lage des Spinmoments

$$\underline{\psi}(\mathbf{r}, t) = \underline{\psi}_{0\uparrow}(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{0\uparrow} t} + \underline{\psi}_{0\downarrow}(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{0\downarrow} t}$$

und nach Einsetzen von $\underline{\psi}_{0\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r})$:

$$\underline{\psi}(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}) \left[e^{-i \frac{(\varphi - \omega_L t)}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + e^{i \frac{(\varphi - \omega_L t)}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t}.$$

Dabei haben wir $E_{0\uparrow(\downarrow)} = E_0 \pm \mu_B B_z$ verwandt und die Frequenz ω_L eingeführt durch die Definition:

$$E_{0\uparrow} - E_{0\downarrow} = 2 \mu_B B_z = \hbar \omega_L.$$

Bildet man nun entsprechend

$$\underline{\psi}^+(\mathbf{r}, t) = \underline{\psi}'^+(\mathbf{r}', t) \underline{\underline{Q}}$$

und berechnet den Erwartungswert von \vec{S} , dann ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{S} \rangle &= \int \underline{\psi}^+(\mathbf{r}, t) \vec{S} \underline{\psi}(\mathbf{r}, t) d^3r = \int \underline{\psi}'^+(\mathbf{r}', t) \underline{Q} \vec{S} \underline{Q}^+ \underline{\psi}'(\mathbf{r}', t) d^3r' \\
&= \frac{\hbar}{2} [\cos(\varphi - \omega_L t) \sin \theta \mathbf{e}_x + \sin(\varphi - \omega_L t) \sin \theta \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z] .
\end{aligned}$$

Hieraus folgt wegen $\vec{M}_{Spin} = \frac{e}{2m_0} g \langle \vec{S} \rangle$ und $g = 2$:

$$\vec{M}_{Spin} = \mu_B [\cos(\varphi - \omega_L t) \sin \theta \mathbf{e}_x + \sin(\varphi - \omega_L t) \sin \theta \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z] .$$

Dieses Resultat ergibt sich also konsequent aus der Quantenmechanik, d. h. aus der zeitabhängigen Pauli-Gleichung, erlaubt aber eine völlig klassische Interpretation:

$\langle \vec{S} \rangle$ und \vec{M}_{Spin} bewegen sich auf einem Kreiskegel mit einem Öffnungswinkel 2θ um die Richtung des Magnetfeldes, wobei ihre Projektionen auf die x/y -Ebene mit der so genannten »Larmor-Frequenz« ω_L um die z -Achse rotieren. Diese Präzessionsfrequenz war gegeben durch:

$$\omega_L = \frac{\mu_B B_z}{\hbar/2} .$$

Sie nimmt also mit wachsendem B_z zu, aber der Öffnungswinkel **2θ bleibt unverändert.**

Die Präzessionsbewegung ist völlig analog zu der eines klassischen Kreisels im Schwerfeld der Erde, der mit der Kreisfrequenz ω um seine Symmetrieachse rotiert und dessen Präzessionsfrequenz ω_P für $\omega_P \ll \omega$ gegeben ist durch:

$$\omega_P = \frac{F r_s}{L}.$$

Dabei ist L der Betrag des Kreiseldrehimpulses, F der Betrag der am Kreiselschwerpunkt angreifenden Schwerkraft und r_s der Abstand des Schwerpunkts vom Stützpunkt der Kreiselachse. Wirkt anstelle des Schwerfeldes ein magnetisches Feld auf den Kiesel und besitzt dieser ein magnetisches Moment μ_B , so gilt $F r_s = \mu_B B_z$. Setzt man dies in die klassische Beziehung für ω_P ein und verwendet $L = \hbar/2$, so ergibt sich genau der Ausdruck für die Larmor-Frequenz.

Gälte auch für den spin-artigen Drehimpuls der klassische magneto-mechanische Parallelismus $\vec{M}_{Spin} = g \frac{e}{2m_0} \langle \vec{S} \rangle$ mit $g = 1$, dann wäre das magnetische Moment gleich $\frac{1}{2} \mu_B$ und die Präzessionsfrequenz um den Faktor 2 kleiner als bei einem klassischen Kiesel mit demselben Drehimpuls $\frac{\hbar}{2}$. Die oben festgestellte Übereinstimmung mit dem Präzessionsverhalten eines klassischen Kreisels spricht also sehr für den anomalen Wert μ_B des magnetischen Moments.

Diese Übereinstimmung lässt sich auch durch folgende Überlegung evident machen. Es war:

$$\vec{M}_{Spin} = \mu_B [\cos(\varphi - \omega_L t) \sin \theta \mathbf{e}_x + \sin(\varphi - \omega_L t) \sin \theta \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z] .$$

Nun folgt aus der vorausgehenden Gleichung für $\langle \vec{S} \rangle$:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{S} \rangle = \mu_B B_z [\sin(\varphi - \omega_L t) \sin \theta \mathbf{e}_x - \cos(\varphi - \omega_L t) \sin \theta \mathbf{e}_y] ,$$

wobei wir $\omega_L = \frac{\mu_B B_z}{\hbar/2}$ benutzt haben. Schreiben wir $\mathbf{B} = B_z \mathbf{e}_z$ und beachten

$$\mathbf{e}_x \times \mathbf{e}_z = -\mathbf{e}_y; \quad \mathbf{e}_y \times \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_x \quad \text{und} \quad \mathbf{e}_z \times \mathbf{e}_z = 0 ,$$

dann lässt sich die rechte Seite der obigen Gleichung offenbar schreiben:

$$\mu_B B_z [\sin(\varphi - \omega_L t) \sin \theta \mathbf{e}_x - \cos(\varphi - \omega_L t) \sin \theta \mathbf{e}_y] = \vec{M}_{Spin} \times \mathbf{B} .$$

Also wird:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{S} \rangle = \vec{M}_{Spin} \times \mathbf{B} \quad \text{“Blochsche Gleichung”} .$$

Dies ist die klassische Bewegungsgleichung für die Drehimpulsänderung eines Kreisel, auf den das Drehmoment $\vec{M}_{Spin} \times \mathbf{B}$ wirkt.